

SuperComputación

Oferta de Servicios desde la UCLM

Rafael Espinosa

Unidad de Sistemas y Redes

Andrés Prado

Director

Área de Tecnología y Comunicaciones

Universidad de Castilla – La Mancha





Bloque I

SERVICIOS TIC EN LA UCLM

Marco soporte del Servicio de SuperComputación

UCLM. TIC. Contexto

- Oferta de servicios TIC a la comunidad universitaria



area.tic.uclm.es

Servicios para la Investigación

- **Servicios Horizontales**
 - Servicios de gestión de identidad
 - Servicios de comunicaciones
 - Comunicaciones Inalámbricas: Integración en red [eduroam](#)
 - Servicios de correo y colaboración
 - Servicios de publicación web
 - Espacios para grupos de investigación
 - Espacios para proyectos de investigación
 - Servicios de Soporte al equipamiento informático
- **Servicios Singulares.**
 - Soporte a la Gestión de la Investigación
 - Soporte a la Investigación de altos requerimientos TIC:
 - Requerimientos de conectividad: [Red IRIS-NOVA](#)
 - Requerimientos de cómputo: [SuperComputación](#)

Servicio de SuperComputación

- **Descripción:**

“El servicio de SuperComputación permite acceder a recursos de cálculo científico o cálculo intensivo utilizando las infraestructuras de servidores y comunicaciones de la UCLM”.

- **Usuarios**

- Comunidad universitaria
- Centros de Investigación externos a la UCLM
- Sector Privado

- **Oferta de Servicio**

- Variables

- Más de 700 cores
- Volumen de Almacenamiento dedicado 53 TB

- Destino

- Grupo de Investigación UCLM: Servicio básico gratuito
- Grupo de Investigación UCLM con altos requisitos: Pago por uso
- Sector Privado. Pago por Uso

Bloque II

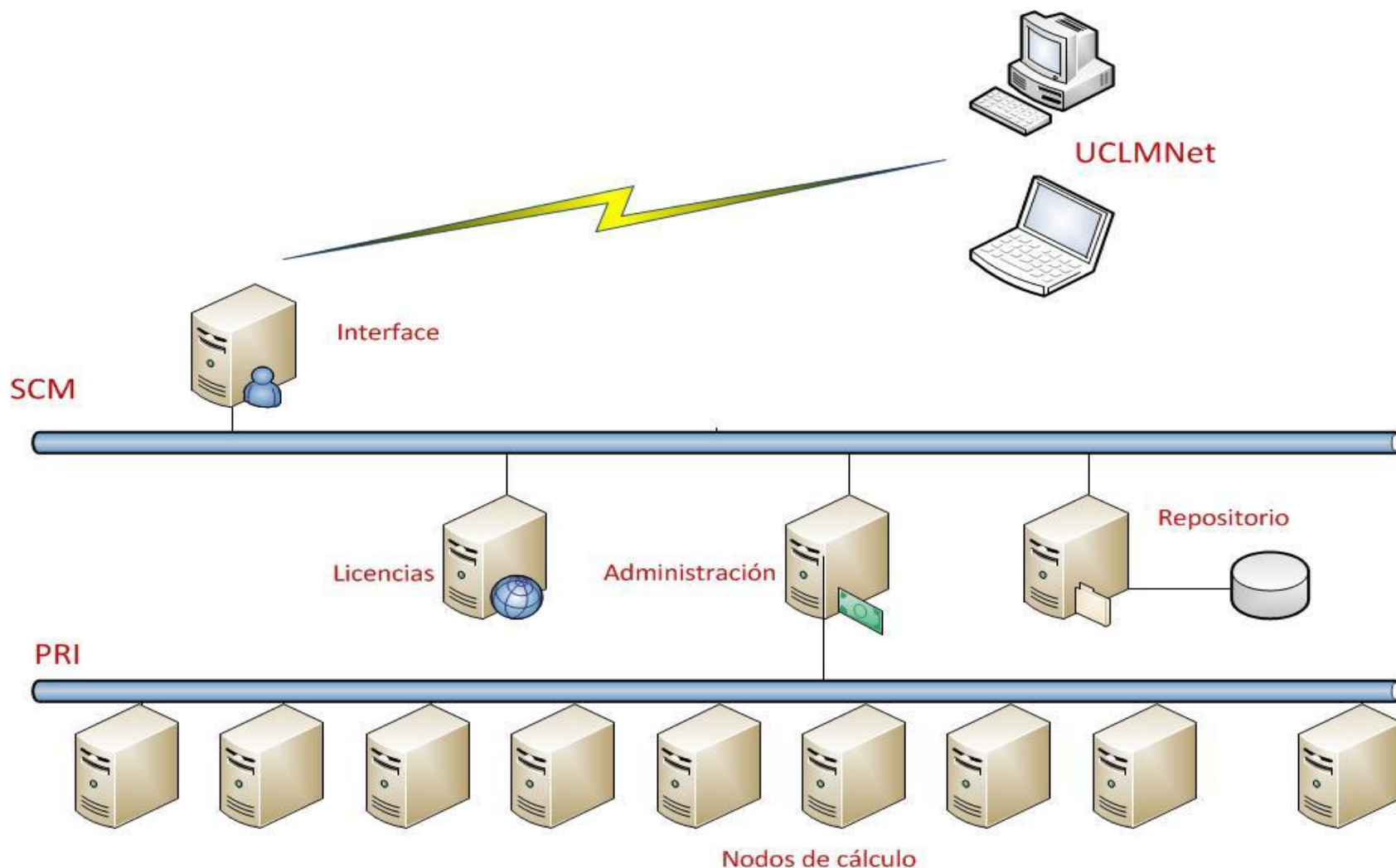
DESCRIPCIÓN SUPERCOMPUTACIÓN UCLM

Arquitectura, recursos y resultados

Madurez del Servicio

- Historia
 - El Servicio arranca en 2.002
 - Concepción distribuida y heterogénea
- Volumen Anual
 - Usuarios en el Servicio: 180
 - Tareas realizadas: 152.062
 - Espacio de usuario ocupado: 18 TB
- Descripción del Servicio
 - <http://area.tic.uclm.es/servicios/ssc/>

Arquitectura



Recursos Hardware

- Capacidad de Procesos

- Cluster HPCx

- Número de cores: 336 (28 nodos x 2 Proc. x 6 cores)
 - Memoria disponible: 1.344 GB (28 nodos x 48 GB)

- Cluster Thales

- Número de cores: 416 (52 nodos x 2 Proc. X 4 cores)
 - Memoria disponible: 832 GB (52 nodos x 16 GB)

- Capacidad de Almacenamiento

- Cabina Infortrend 16: 5 TB
 - Cabina Infortrend 24: 16 TB
 - Cabina HP EVA 4000: 32 TB

Recursos Software

■ Software Comercial

- Fluent CFD
- Matlab 2010R
- NBO y NBOView
- EDEM
- Gaussian 03
- Gaussian 09
- Gview
- COMSOL
- Abaqus 6.12-1
- Adina
- Portland Group Compilers C/C++/Fortran
- Intel Compiler Suite C/C++/Fortran

Recursos Software

- Software Fuentes Abiertas
 - PVM
 - MPI
 - GNU Compilers C/C++/Fortran
 - Java
 - Molden
 - NWChem



Bloque III

RESULTADOS

Aplicación de uso del servicio

Escenario de uso

■ Predicción de Cáncer de Próstata

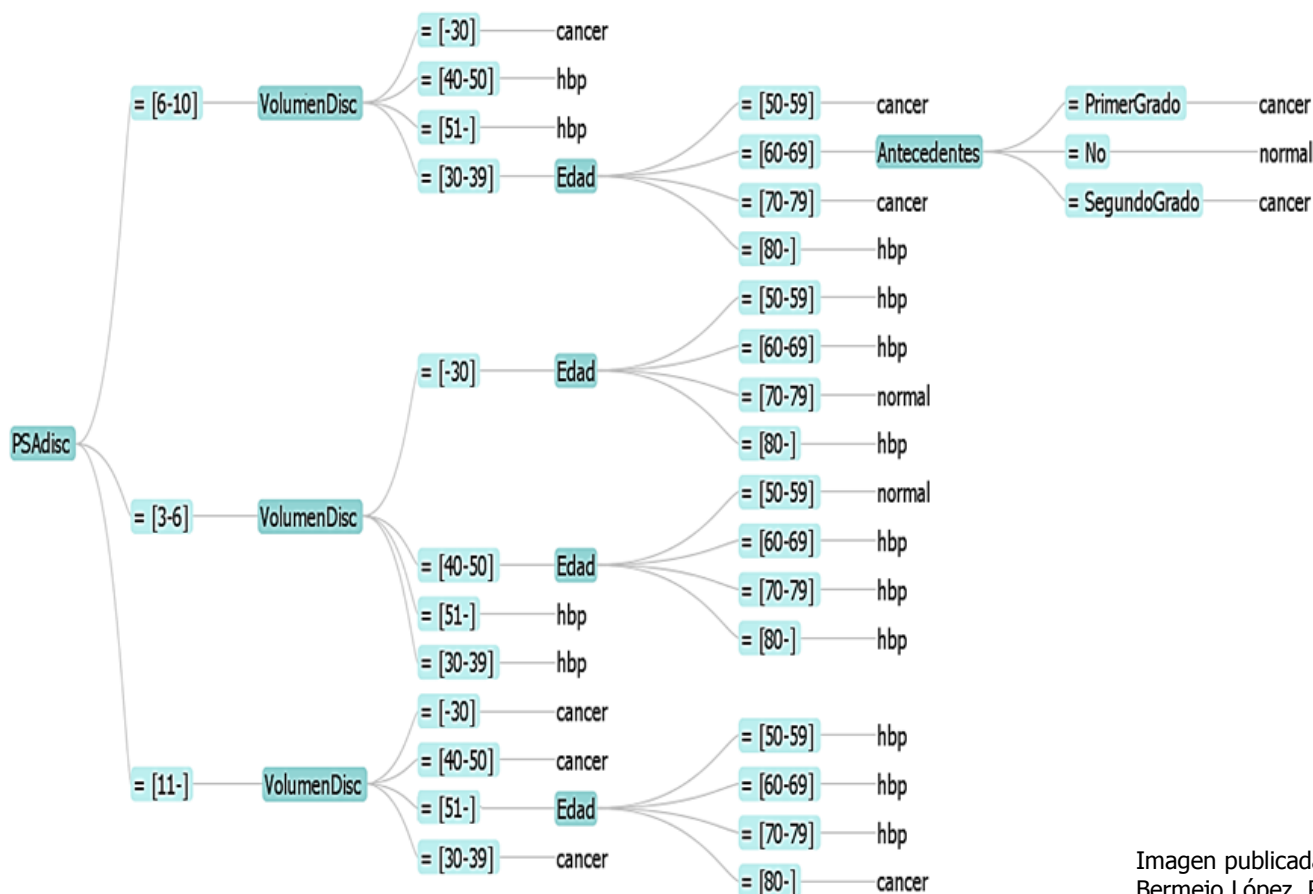


Imagen publicada con la autorización de:
Bermejo López, Pablo

Escenario de uso

■ Predicción Meteorológica

Modelos meteorológicos.



Modelo: Promes	Horizonte 3	Capas <input checked="" type="checkbox"/> Sólidos	<input type="checkbox"/> Contornos	<input type="checkbox"/> Vectores
Simulación: 2012-12-03 08	⏪ ⏩ ⏴ ⏵	Temperatura a 2 m (C)	Geopotencial a 500hPa (Dirección del viento a 10

Inicio simulación: Lun 3 de Diciembre 2012 - 6h GMT

Hora predicción: Lun 3 de Diciembre 2012 - 10h hora local

Sólidos: Temperatura a 2 m (C)

Contornos: -----

Vectores: -----

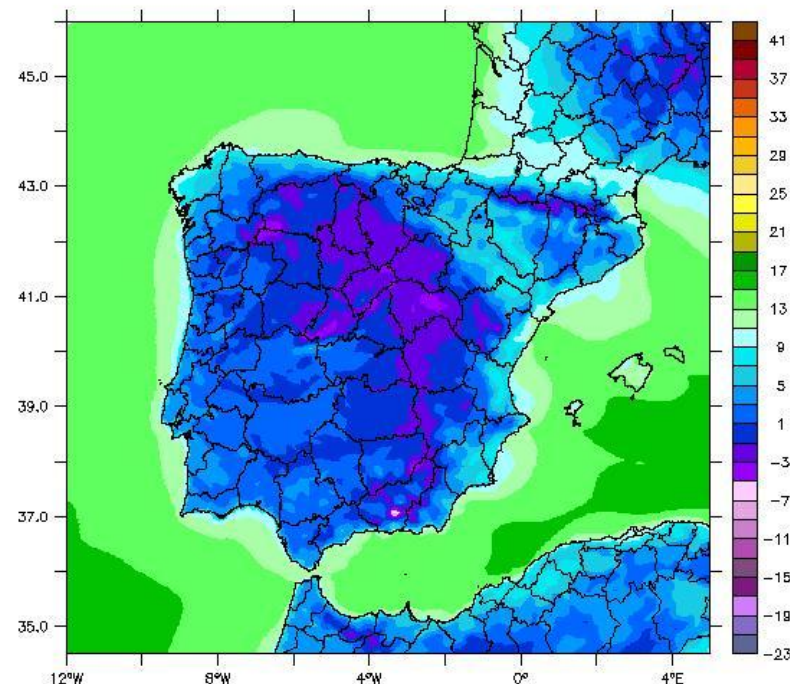


Imagen publicada con la autorización de:
Romera Ruíz, Raquel

Escenario de uso

■ Selección de Variables

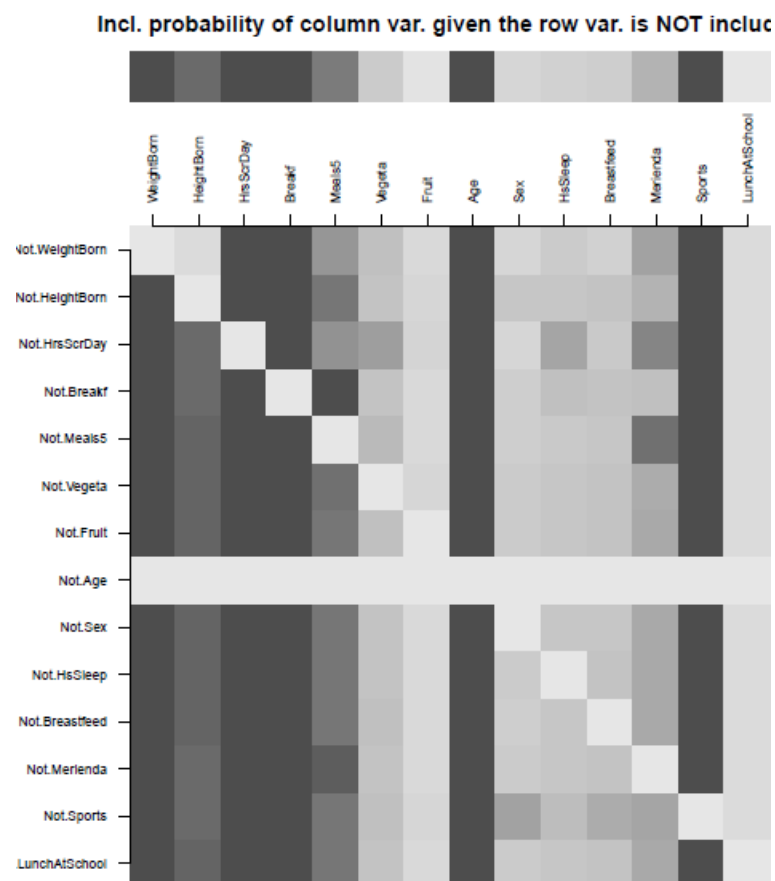
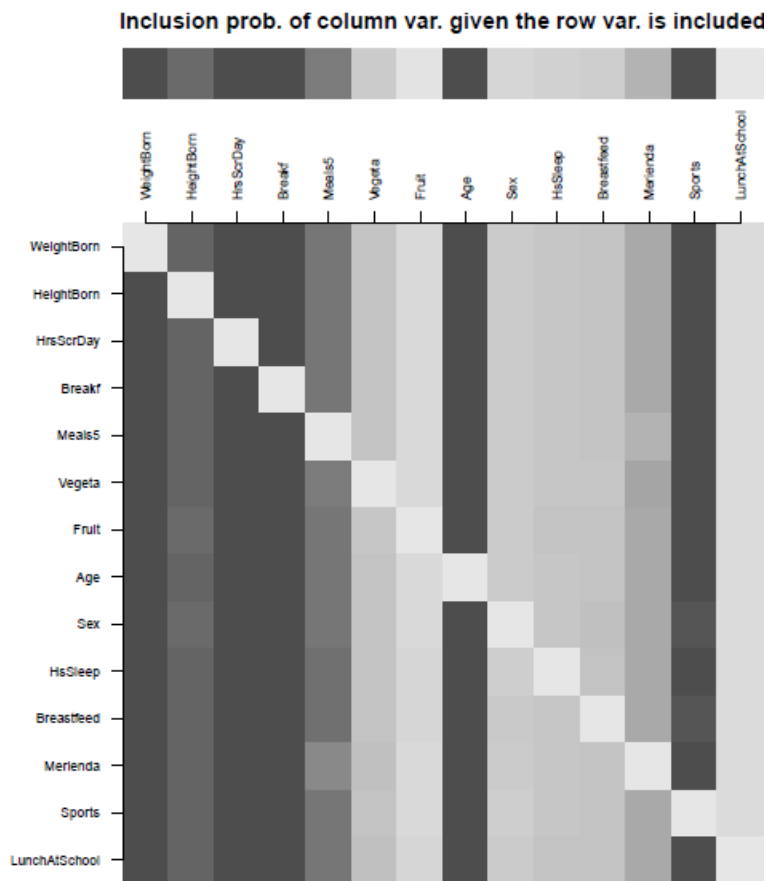
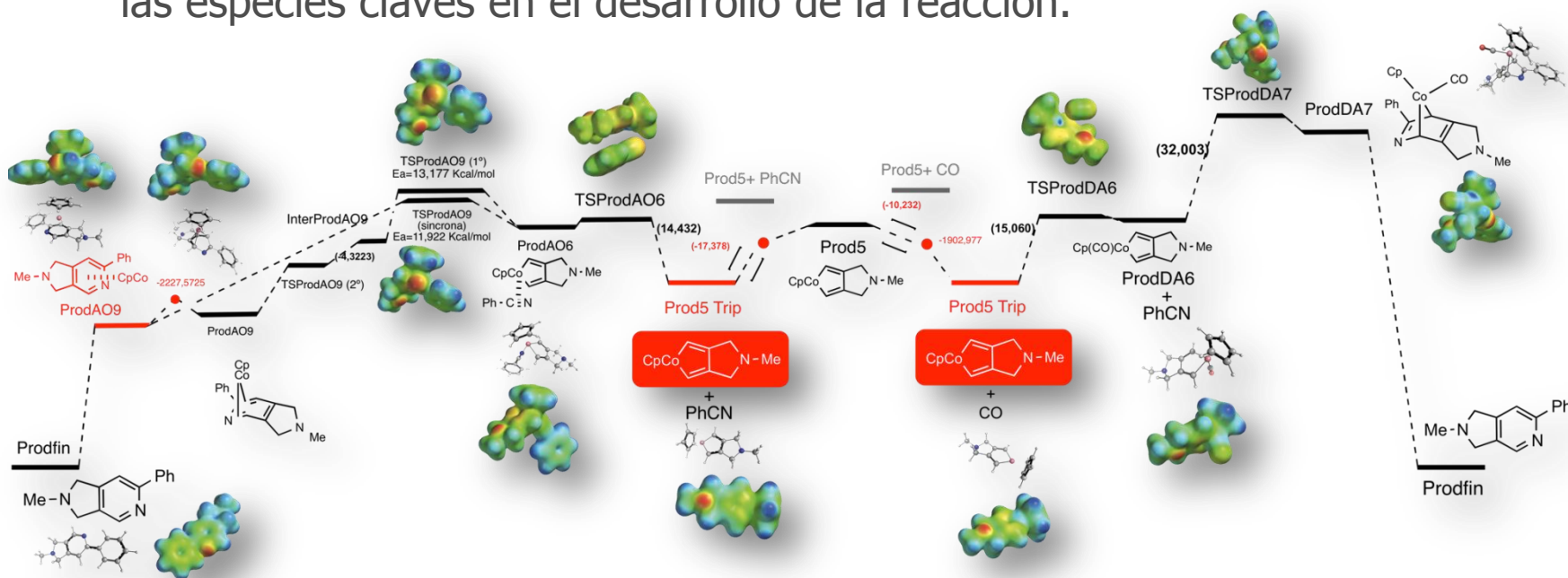


Imagen publicada con la autorización de: García-Donato Layrón, Gonzalo

Escenario de uso

■ Reacciones Químicas

Una de las aplicaciones es la completa determinación de perfiles de reacciones químicas, pudiendo determinar caminos de reacción preferentes, así como la descripción de las especies claves en el desarrollo de la reacción.



Agradecimientos

CHEMISTRY
A EUROPEAN JOURNAL

FULL PAPER

DOI: 10.1002/chem.201103560

DFT Studies on Cobalt-Catalyzed Cyclotrimerization Reactions: The Mechanism and Origin of Reaction Improvement under Microwave Irradiation

Antonio M. Rodríguez,^[a] Cristina Cebrián,^[a] Pilar Prieto,^{*,[a]} José Ignacio García,^{*,[b]}
Antonio de la Hoz,^[a] and Ángel Díaz-Ortiz^[a]

Acknowledgements

Financial support from the DGCYT of Spain through project CTQ2011-22410, and project CTQ2011-28124 from the Consejera de Educación y Ciencia, JCCM through project PII2I09-0100, and to Prof. Harvey, who provided us with the MECP program. [Technical support from the High Performance Computing Service of University of Castilla-La Mancha is gratefully acknowledged.](#)

Agradecimientos



Taylor & Francis

[Publication History](#)
[Sample copy](#)
[Alert me](#)

Journal of the American Statistical Association



An Official Journal of the American Statistical Association

ISSN

0162-1459 (Print), 1537-274X (Online)

Publication Frequency

4 issues per year

☒ On sampling strategies in Bayesian variable selection problems with large model spaces

García-Donato Gonzalo, Martínez-Beneito & Miguel A.

DOI: 10.1080/01621459.2012.742443

Accepted author version posted online: 20 Nov 2012

Citations: 0

Article Views: 23


[View full text](#)

[Download full text](#)
[Full access](#)
Further Information
[Abstract](#) | [Supplementary](#) | [References](#) | [Related](#)

Acknowledgements

We would like to thank Susie Bayarri and Jim Berger for very fruitful discussions about the problem of estimation in large model spaces. We also want to thank Rafael Espinosa at the

Supercomputing Center in the Institute for Research in Information Technology at the Universidad de Castilla-La Mancha for providing us with technical support. We would also like to thank the suggestions of two anonymous reviewers as they have led to a much improved version of the paper. This study has been partially funded by a project granted by the Spanish Ministry of

Science and Education coded MTM2010-19528.

Referencias



El Área TIC de la UCLM

<http://area.tic.uclm.es>

Descripción Servicio Supercomputación UCLM

<http://area.tic.uclm.es/servicios/ssc/>

Proyecto Movilidad eduroam

<http://www.eduroam.es/>

Red IRIS-NOVA

<http://www.redirisnova.es/>

Rocks Clusters

<http://www.clusterrocks.org/>

Peticiones

<http://cau.uclm.es/>

Contacto

Servicio.Supercomputacion@uclm.es